Pétaflop/s mode d'emploi

HPC et mécanique des fluides

Simulations directes de la réduction de traînée turbulente par additif polymérique

L. Thais[1], G. Mompean[1]
A.E. Tejada-Martinez[2], T.B. Gatski[3]

[1] Université Lille Nord de France - USTL & LML-CNRS, France
[2] University of South Florida, Dept Civil and Env. Engineering, USA
[3] Institut Pprime, CNRS, Poitiers, France

Introduction...Les pionniers

- B.A. Toms
  (Proc. 1st Int. Conf. Rheology, 1949)

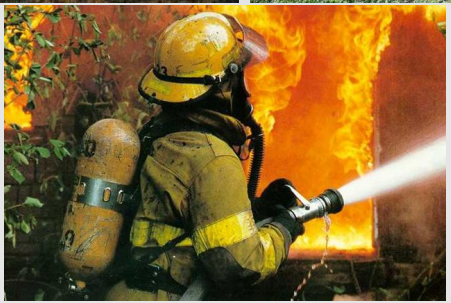
" *La dilution à des taux* ***infinitésimaux*** *d'un polymère de fort poids moléculaire* ***réduit considérablement le frottement turbulent*** "

$\Rightarrow$ **Phénomène de Toms**

- P.S. Virk (JFM, 1967) & (AIChE, 1975)

$\Rightarrow$ **Saturation du taux de réduction du frottement turbulent**

Introduction...Applications industrielles



L'ennemi de l'ingénieur : le frottement turbulent...

Réduction de traînée active : palmarès des additifs

Nature additif	**Réduction de traînée observées**
Poussières (dans gaz)	5 à 10%
Bulles d'air	20 à 30%
Fibres rigides (ex : amiante)	45 à 70%
Surfactants	55 à 70%
Polymères élastiques	65 à 75%
Mélange polymères,surfactants,fibres	65 à 85%

Spécificité de la réduction de traînée polymérique :

$\Rightarrow$ Réduction **significative** à des taux de dilution **infimes**

Introduction...Mais aussi : les écoulements à surface libre...

En haut: jet libre d'eau pure
En bas: jet libre dilution à 200ppm de PEO (Oxyde de polyéthylène)

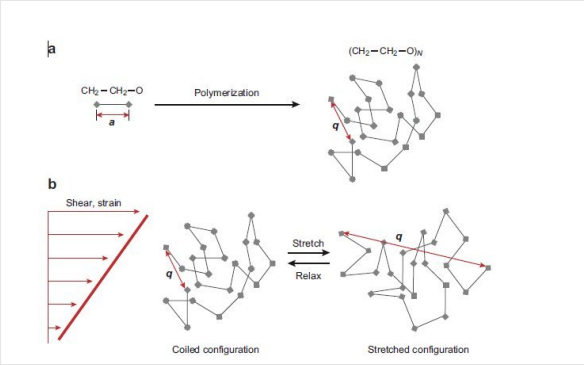
Bird, Armstrong & Hassager, Dynamics of Polymeric Liquids, 2ème Ed.

⇒ Noter la disparition des petites échelles turbulentes
et des gouttelettes en présence du polymère

Introduction...Comment expliquer la réduction de traînée ?

• Comment expliquer théoriquement la réduction de traînée par dilution de polymère ?

• Qu'est-ce qu'un nano-polymère, quel est son comportement en écoulement cisaillé ?



- Macro-molécule polymérisée caractérisée par :

  $\Rightarrow$ vecteur **q** reliant les 2 extrémités de la molécule

- Cette molécule subit 2 types de forces :

  $\Rightarrow$ Force **interne** de rappel **élastique**

  $Stretched --> Coiled \quad \| \mathbf{q} \| \searrow$

  $\Rightarrow$ Force **externe** (shear)

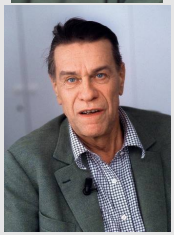
  $Coiled --> Stretched \quad \| \mathbf{q} \| \nearrow$

Introduction...Comment expliquer la réduction de traînée ?

- La théorie "*visqueuse*" de Lumley (*ARFM*, 1969)

  ⇒ Le polymère s'étire dans la "buffer layer", ceci augmente la **viscosité élongationnelle** de la dilution, supprimant les petites échelles turbulentes et donc ⇒ DR

- La théorie "*élastique*" de De Gennes (*Physica A*, 1986)



  ⇒ Le polymère a un comportement essentiellement élastique, il "stocke" l'énergie turbulente à une échelle de longueur > à l'échelle de Kolmogorov

  ⇒ Ceci interrompt la cascade d'énergie, d'où suppression des petites échelles turbulentes et donc ⇒ DR

- Ces 2 théories ne sont **pas départagées** à ce jour (White & Mungal, *ARFM*, 2008)

Introduction..Simulations directes, bibliographie sommaire

- Simulations directes de la réduction de traînée turbulente avec un fluide viscoélastique (sélection) :
  - Sureshkumar, Beris & Handler (*Phys. Fluids*, 1997) - FENE-P
  - Dimitropoulos *et al.*(*JNNFM*, 1998) - FENE-P & Giesekus
  - Min *et al.*(*JFM*, 2003a, 2003b) - Oldroyd-B
  - Dubief *et al.*(*JFM*, 2004) - FENE-P
  - Dimitropoulos *et al.*(*Phys. Fluids*, 2005, *JFM*, 2006) - FENE-P
  - Housiadas *et al.*(*Phys. Fluids*, 2003 2005, *JNNFM*, 2006) - FENE-P
- Les DNS précédentes sont limitées:
  - soit en **nombre de Reynolds** (Dubief *et al.*, $L_x = 10$, mais $Re_{\tau 0} = 300$)
  - soit en **longueur de canal** (Housiadas *et al.*, $Re_{\tau 0} = 590$, mais $L_x = 2\pi$), ce qui limite le régime de réduction de traînée exploré

Introduction...Buts de ce travail

- Ce travail a pour buts de :
  - Produire des DNS à nombres de Reynolds plus élevés et dans un canal suffisamment long
  - Mettre la base de données à disposition de la communauté
- Plan de l'exposé :
  1. Equations
  2. Le code *NNEWT_SOLVE* - Parallélisme
  3. Base de données DNS
  4. Conclusions & Perspectives

1. Equations (sans dimension)

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\beta_0}{Re_b}\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + \frac{(1-\beta_0)}{Re_b}\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + e_i \delta_{i1}$$

$$\tau_{ij} = \frac{f(\{\mathbf{c}\})\, c_{ij} - \delta_{ij}}{We_b}$$

$$\frac{\partial c_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial c_{ij}}{\partial x_k} - \frac{\partial u_i}{\partial x_k} c_{kj} - \frac{\partial u_j}{\partial x_k} c_{ki} + \frac{f(\{\mathbf{c}\})\, c_{ij} - \delta_{ij}}{We_b} = \left(\frac{1}{Pr_c Re_b}\right) \frac{\partial^2 c_{ij}}{\partial x_k^2}$$

$\Rightarrow$ Modèle de FENE-P = Finitely Extensible Nonlinear Elastic in the Peterlin approximation, approprié pour les solutions polymériques diluées

$\Rightarrow$ On doit s'attendre à une surcharge CPU d'un facteur $\simeq 3$ pour un calcul viscoélastique / calcul newtonien

– Les nombres sans dimension apparaissant dans ces équations :

- Nombre de Reynolds Re_b

  $\Rightarrow$ Basé sur la viscosité totale de la solution à taux de cisaillement nul

- Nombre de Weissenberg We_b

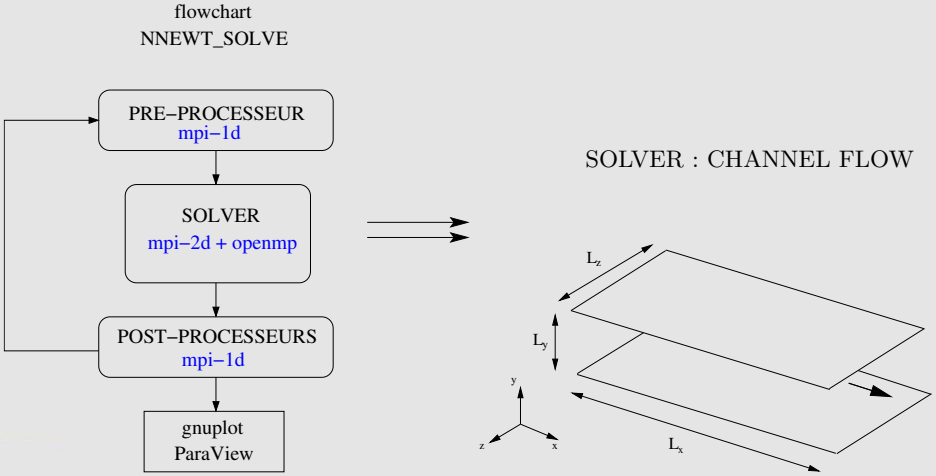
  $\Rightarrow$ Représente l'élasticité du fluide / inertie

- Le rapport β_0 de la viscosité du solvant / la viscosité totale de la solution

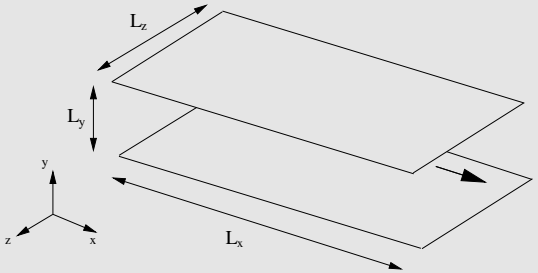
  $\Rightarrow$ $(1 - \beta_0)$ est proportionnel au taux de dilution du polymère ($\beta_0 = 0.9$)

2. Le code NNEWT_SOLVE

- Constitué d'un ensemble Solver & Pré/Post-Processeurs
- Solver mixte MPI/OPENMP adapté pour architectures **massivement parallèles**
- Pré/Post-Processeurs MPI adaptés pour architectures plus modestes (type frontale)



- **Discrétisation spatiale hybride**



  ⇒ Fourier dans les directions périodiques x et z

  ⇒ Différences finies compactes d'ordre 6 dans la direction y (Lele, 1992), avec mapping hyperbolique pour concentrer les noeuds vers les parois

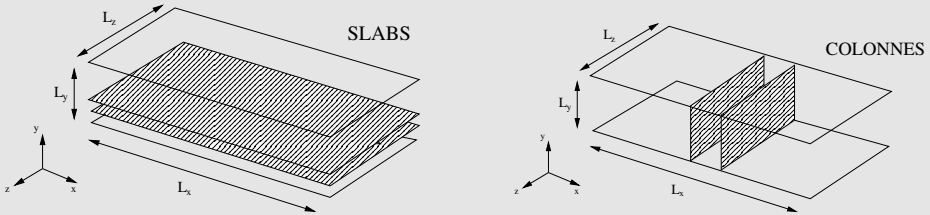
- **Discrétisation temporelle**

  ⇒ Adams-Bashforth d'ordre 2, 3 ou 4 pour les pas explicites

  ⇒ Adams-Moulton d'ordre 2 ou 3 pour les pas implicites

- L'approche usuelle des codes mixtes Fourier/FD ou Fourier-Chebyshev

  $\Rightarrow$ Utiliser une grille MPI uni-dimensionnelle, comprenant p_1 processus



  $\Rightarrow$ Données réelles sont scindées dans des "SLABS" parallèles aux parois

$$DATA_REAL(x,z,y) - - > DATA_REAL(x,z,y \rightarrow p_1)$$

  - On calcule les FFT-2d dans les directions périodiques x et z

  $\Rightarrow$ Données complexes sont transposées en "COLONNES" orthogonales aux parois

$$DATA_CPLX(x,z,y) - - > DATA_CPLX(x \rightarrow p_1,z,y)$$

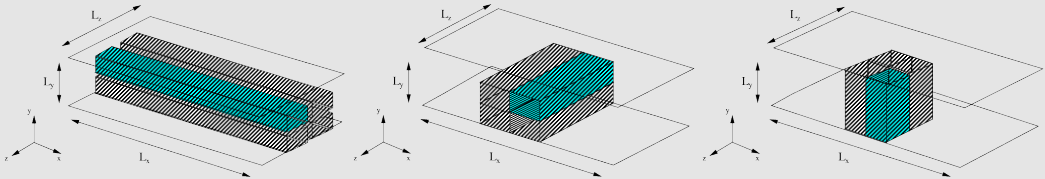
  - Résolution en différences finies (ou Chebyshev) dans la direction y

– Inconvénient majeur : p_1 doit être $<$ au nombre de noeuds selon x et y
$\rightarrow$ non scalable sur machine massivement parallèle

2. Code NNEWT_SOLVE...
> Parallélisme du SOLVER...suite

- Solution adoptée pour le SOLVER

  $\Rightarrow$ Utiliser une grille MPI bi-dimensionnelle, comprenant $np = p_1 \times p_2$ processus



  $\Rightarrow$ Données sont successivement scindées dans des "SUBSETS" dénommés

$$XBLOCK: \quad DATA_REAL(x,z,y) \; -> \; DATA_REAL(x, z \to p_1, y \to p_2) \; -> \text{FFT-1d en x}$$
$$ZBLOCK: \quad DATA_CPLX(z,x,y) \; -> \; DATA_CPLX(z, x \to p_1, y \to p_2) \; -> \text{FFT-1d en z}$$
$$YBLOCK: \quad DATA_CPLX(y,x,z) \; -> \; DATA_CPLX(y, x \to p_1, z \to p_2) \; -> \text{FD en y}$$

  $\Rightarrow$ Noter que pour les 3 SUBSETS le PREMIER INDICE est toujours l'INDICE LOCAL

  - Ceci permet le calcul des FFT-1d par lots en "STRIDE 1" $->$ speedup
  - La résolution FD opère sur des vecteurs de données adjacentes en mémoire $->$ speedup

- Solution adoptée pour le SOLVER

  $\Rightarrow$ permet de déployer le code sur une machine massivement parallèle car $np = p_1 \times p_2 > 10^3$

  $\Rightarrow$ permet une grande souplesse d'utilisation dans le choix du mapping $p_1 \times p_2$

- Exemple : maillage 512^3

  $\Rightarrow$ Avec une grille mpi **uni-dimensionnelle**, le nombre maximum de processus est $np = 256$

  $\Rightarrow$ Avec une grille mpi **bi-dimensionnelle**, le nombre théorique maximum de processus est $np = 256 \times 512 = 131\,072$!?

  $\Rightarrow$ Un choix sans doute plus judicieux est de calculer ce cas sur $np = 4096$ processus, avec une grande souplesse dans les mappings mpi possibles : $p_1 \times p_2 = 16 \times 256 = 32 \times 128 = 64 \times 64$, etc.

- $\exists$ quand même des contraintes :

  $\Rightarrow$ $2 \times p_1$ doit être un diviseur de N_x et N_z

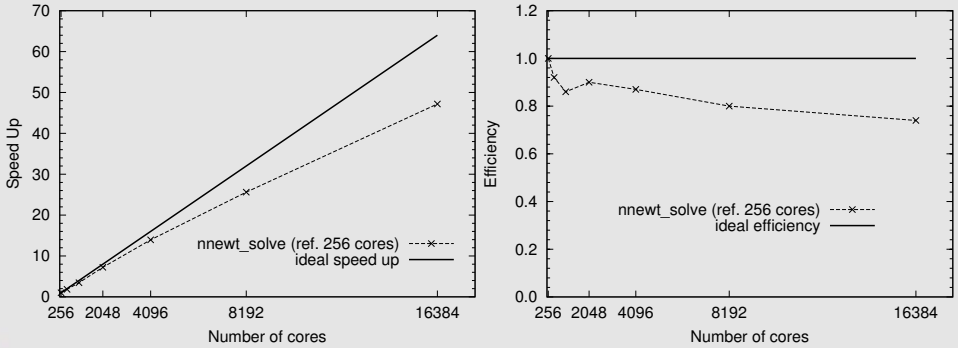
  $\Rightarrow$ l'efficacité parallèle sera optimale si p_2 est un diviseur de N_y

- L'efficacité // du solver repose sur les transpositions entre les $\neq$ SUBSETS

$$XBLOCK <--> ZYBLOCK <--> YBLOCK$$

$\Rightarrow$ Utilisation de routines optimisées : *p3dfft (D. Pekurovsky, SDSC)*

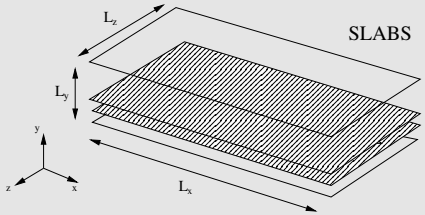
- Accélération (à gauche) et efficacité (à droite) jusqu'à 16 384 coeurs, Blue Gene/P, IDRIS-CNRS



- Pré- et post-processeurs

  ⇒ Doivent être parallèles, mais ne doivent pas utiliser plusieurs milliers de processus

  ⇒ Utilisent une grille MPI-1d comprenant p_1 processus



— Données scindées en “SLABS” parallèles aux parois

— Typiquement, $p_1 = 1$ à 16 processus permettent de pré/post traiter des grilles de 10^7 à 10^9 noeuds

- Entrées-Sorties du SOLVER

  ⇒ ~~Un fichier par processus~~, nombre de fichiers prohibitif

  ⇒ ~~Parallel NetCDF, HDF5~~, syntaxe lourde & utilisation complexe

  ⇒ 1 seul fichier binaire à accès direct, meilleur compromis entre simplicité & performance

  — Attention aux verrous : 2 processus ne doivent jamais écrire en même temps au même endroit

3. La base de données DNS

- Dimensions du canal : $L_x = 8\pi h \times L_z = 1.5\pi h \times$ entrefer $L_y = 2h$
- FENE-P, Solution polymérique diluée à $1 - \beta_0 = 0.1$

maillage	coeurs BG/P	$Re_{\tau 0}$	$We_{\tau 0}$	DR
$512 \times 128 \times 129$	256	180	55	29%
$512 \times 128 \times 129$	256	180	75	51%
$512 \times 128 \times 129$	256	180	115	64%
$1024 \times 256 \times 257$	4 096	395	115	62%
$1536 \times 512 \times 257$	8 192	590	115	61%
$2048 \times 768 \times 513$	16 384	1000	115	59%

$\Rightarrow$ $Re_{\tau 0}$, $We_{\tau 0}$ = Reynolds et Weissenberg frictionnels à cisaillement nul

$\Rightarrow$ DR = réduction de traînée (en pourcentage)

$\Rightarrow$ En bleu : Reynolds constant, élasticité variable

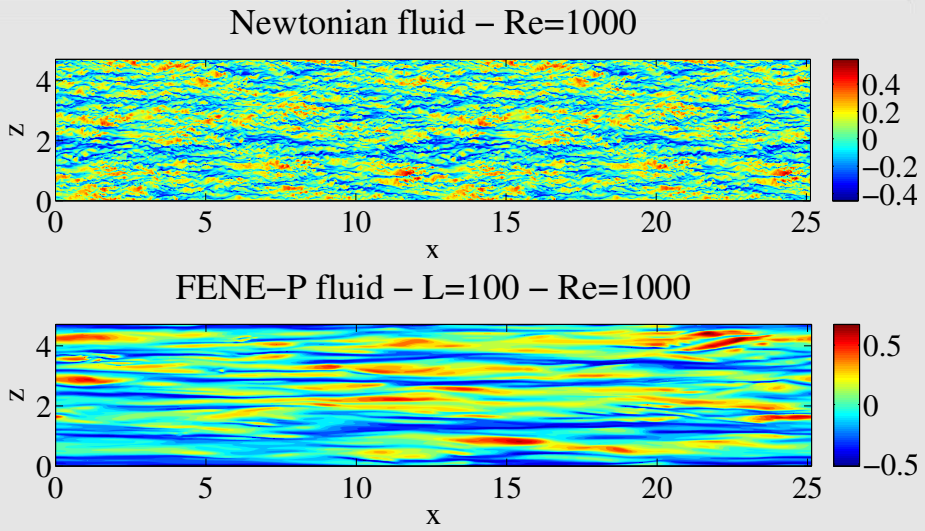
$\Rightarrow$ En rouge : Elasticité constante, Reynolds variable

$\Rightarrow$ Maillages de 10^7 à 1.3×10^9 noeuds (avec de-aliasing)

Résolution spatiale: $9 \leq \Delta x+ \leq 17, \quad 6 \leq \Delta z+ \leq 14, \quad 0.2 \leq \Delta y+ \leq 8$

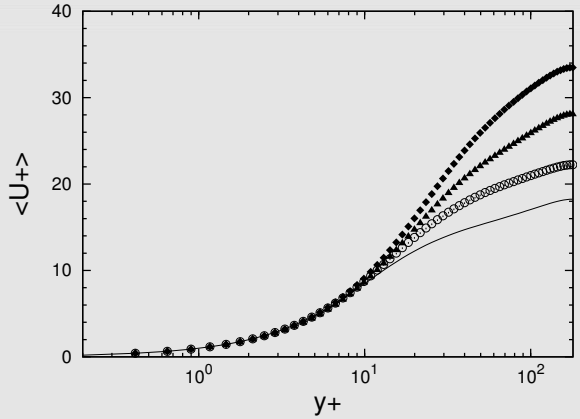
Université Lille1 Sciences et Technologies

LABORATOIRE de MECANIQUE de LILLE UMR CNRS 8107



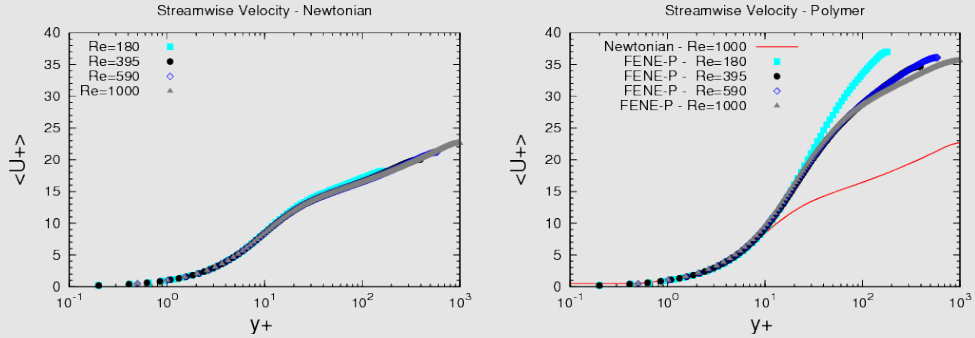
- Action du polymère est en effet de supprimer **les petites échelles turbulentes** dans la buffer layer

3. DNS...Reynolds constant $Re_{\tau 0} = 180$
> Ecoulement moyen



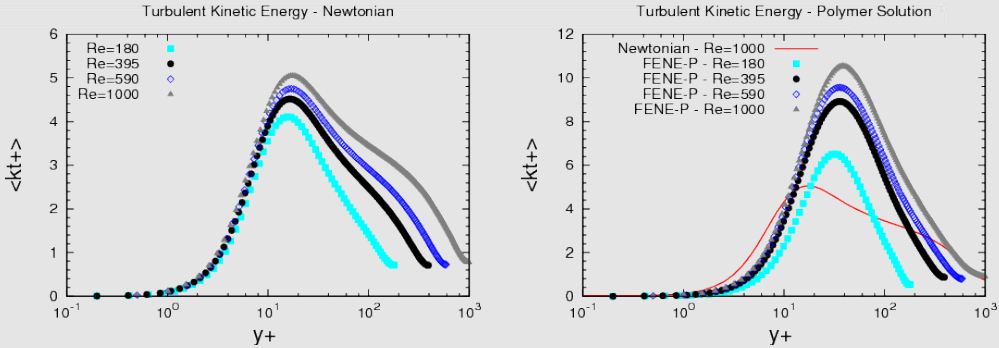
- Trait plein: newtonien ; Symboles: Solution polymérique avec elasticité croissante de bas en haut ($DR = 29\%, 51\%, 64\%$)
- Zone inertielle logarithmique repoussée loin de la paroi à faible DR (offset)
- Pente de l'écoulement moyen augmente avec DR, disparition de la zone inertielle logarithmique à $DR = 64\%$.

3. Elasticité constante $We_{\tau 0} = 115$, Reynolds variable
> Ecoulement moyen



- À gauche : newtonien ; à droite : Solution polymérique
- Obtention d'un profile universel pour le fluide newtonien
- Pour la solution polymérique, la pente de l'écoulement moyen décroît avec $Re_{\tau 0}$

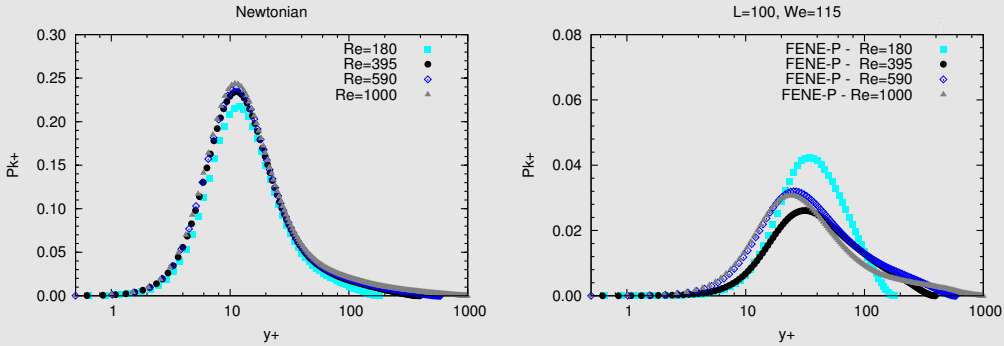
3. tke (turbulent kinetic energy)



- À gauche : newtonien ; à droite : Solution polymérique
- Action du polymère dépend visiblement du nombre de Reynolds

  $\Rightarrow$ tke augmente avec $Re_{\tau 0}$, en écoulements newtonien et viscoélastique
- tke est environ doublée pour l'écoulement viscoélastique / newtonien, et son pic éloigné de la paroi

3. Production de tke



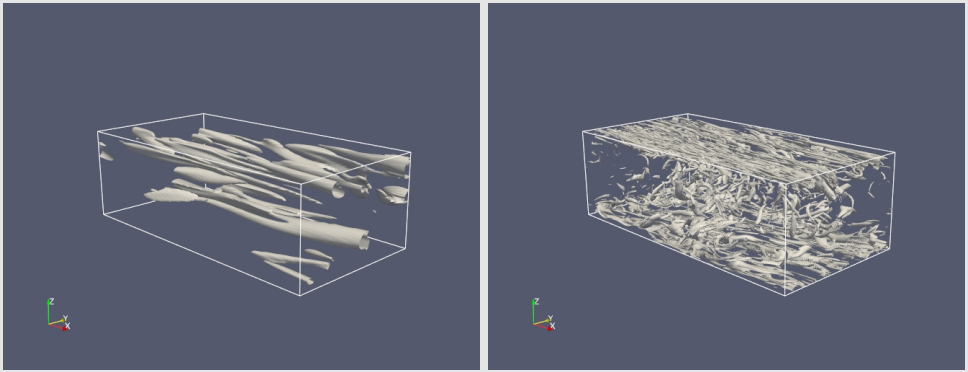
- À gauche : newtonien ; à droite : Solution polymérique
- ...tke est doublée, mais pour autant

  $\Rightarrow$ la production de tke est divisée par 6 !

  $\Rightarrow$ et son pic à nouveau éloigné de la paroi

3. Isovaleurs du critère $Q \simeq 0$ pour $Re_{\tau 0} = 180$ et $Re_{\tau 0} = 1000$

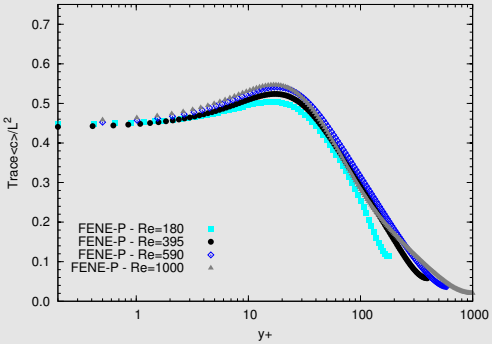
- Comment tke peut-il augmenter et sa production diminuer simultanément ?



- La turbulence s'organise en tubes de vortex alignés dans l'axe du canal

$\Rightarrow$ Ces grosses structures cohérentes semblent ne pas contribuer à la production de tke

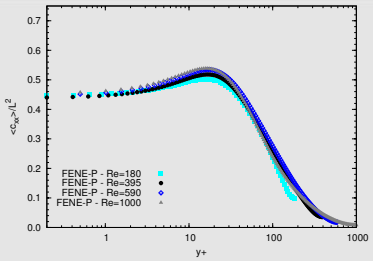
3. Trace du tenseur de conformation

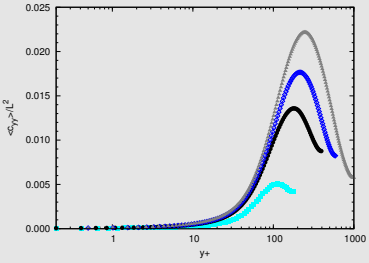


- Trace$\langle \mathbf{c} \rangle$ représente l'étirement (isotrope) du polymère
- Max de Trace$\langle \mathbf{c} \rangle$ situé en $y+ \simeq 20$
- Ceci va dans le sens de la théorie de Lumley

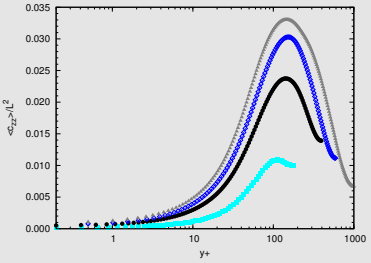
3. Composantes normales du tenseur de conformation

$\langle c_{xx} \rangle$





$\langle c_{yy} \rangle$



$\langle c_{zz} \rangle$

- Encore mieux pour Lumley : le polymère est essentiellement étiré dans la direction x

3. Le point de vue de De Gennes : Bilan d'énergie élastique

- Derrière la théorie de De Gennes se cache la notion d'interaction **Polymère-turbulence**, dont le mécanisme peut être évalué vie le bilan d'énergie élastique :

$$< k_e >= \frac{1}{2}\left(\frac{1-\beta_0}{Re_{\tau 0}}\right) < \tau_{ii} >$$

- Ce bilan s'écrit

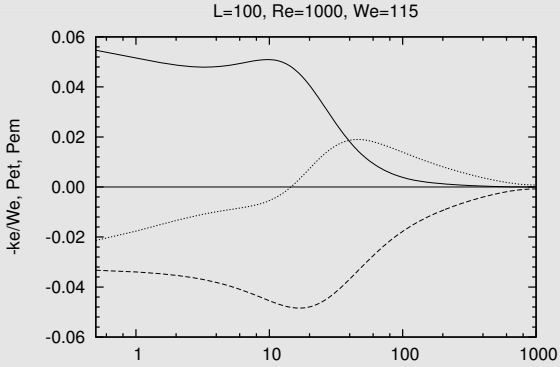
$$\frac{\mathrm{d} < k_e >}{\mathrm{d}t} =< P_{em} > + < P_{et} > - \frac{< k_e >}{We_{\tau 0}}$$

$\Rightarrow$ où $< P_{em} >= \frac{1-\beta_0}{Re_{\tau 0}} < \tau_{xy} > \frac{\partial < U >}{\partial y}$ est la production de $< k_e >$ par l'écoulement moyen

$\Rightarrow < P_{et} >= \frac{1-\beta_0}{Re_{\tau 0}} < \tau'_{ij} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} >$ est la production de $< k_e >$ par la turbulence

$\Rightarrow -\frac{< k_e >}{We_{\tau 0}}$ est le terme d'auto-dissipation (!?) de $< k_e >$

3. Le point de vue de De Gennes : Bilan d'énergie élastique



- La production de $< k_e >$ par l'écoulement moyen a lieu en zone de proche paroi ($y+ < 20$)
- Sa production par la turbulence a lieu au-delà de $y+ \simeq 25$, et on a toujours $P_{et} > P_{em}$ **en s'éloignant de la paroi**
- Ceci est en accord avec la théorie de De Gennes, qui considère l'effet de paroi négligeable dans le phénomène de réduction de traînée

4. Conclusions & Perspectives

- DNS turbulence en présence de polymère élastiques sont possibles sur machine massivement parallèle :

  $\Rightarrow$ jusqu'au nombre de Reynolds $Re_{\tau 0} = 1000$

  &

  $\Rightarrow$ à fort régime de réduction de traînée $\simeq 60\%$

- Base de données est en cours d'analyse. Pour l'instant nous conclurons en déclarant...

  match nul entre Lumley et De Gennes...

Merci pour votre attention !